

На основе полученных твердых растворов были изготовлены плечные электроды с твердым контактом. В качестве инертной матрицы использовали полистирол. Исследованы основные характеристики электродов: крутизна и область линейности основной электродной функции, время отклика, рабочая область рН. Полученные данные представлены в таблице.

Электродно-активное вещество	Область линейности, моль/л	Крутизна электродной функции, мВ/рC <sub>Рв</sub> <sup>2+</sup>	Время отклика, мин.	Рабочая область рН
PbNb <sub>4</sub> O <sub>11</sub>	10 <sup>-4</sup> - 10 <sup>-1</sup>	-(20,8±2,2)	10-15	5,0-3,5
Pb <sub>0,9</sub> Ba <sub>0,1</sub> Nb <sub>4</sub> O <sub>11</sub>	10 <sup>-5</sup> - 10 <sup>-1</sup>	-(22,6±1,8)	5-10	5,0-4,0
Pb <sub>0,9</sub> Sr <sub>0,1</sub> Nb <sub>4</sub> O <sub>11</sub>	10 <sup>-6</sup> - 10 <sup>-1</sup>	-(21,1±2,4)	10-15	5,0-3,9

В работе для целей ионометрии синтезированы пять танталатов свинца с соотношением PbO:Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> = 1:1, 2:1, 3:1, 4:1, 5:1.

Исследована их устойчивость в кислых средах, проведены пробные испытания ИСЭ на основе однофазных танталатов.

*НИИР выполнена при поддержке Министерства образования и науки в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (ГК №П984 от 27 мая 2010).*

## ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА БИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ГИБЕЛИ H<sub>2</sub>COO

*Птицына А.А., Талипов М.Р., Хурсан С.Л., Сафиуллин Р.Л.*

Институт органической химии УНЦ РАН  
450054, г.Уфа, проспект Октября, д. 71

В ходе данного исследования методами квантовой химии в приближении MCQDPT2//CASSCF в различных активных пространствах и с использованием базисных наборов 6-31G(d), 6-311G(d,p) и 6-311+G(d,p) был изучен бимолекулярный механизм гибели карбонилоксидов. Показано, что реализация синхронного (3+3)-циклоприсоединения невозможна ввиду различной симметрии НВМО и ВЗМО орбиталей (рис.1), в соответствии с правилом Вудворда-Хоффмана об орбитальной симметрии.

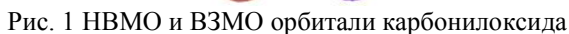


Рис. 2 Ациклический интермедиат I.

$$\begin{array}{c}
 \text{H}_2\text{C} \quad \text{O-O} \quad \text{CH}_2 \\
 \diagup \quad \diagdown \\
 \text{O-O} \quad \text{CH}_2 \\
 \diagdown \quad \diagup \\
 \text{H}_2\text{C}
 \end{array}
 \leftarrow \left[ \begin{array}{c} \text{1} \\ \text{H}_2\text{C} \quad \text{O} \quad \text{O} \quad \text{H}_2\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array} \right] \xleftrightarrow{2\text{CH}_2\text{OO}} \left[ \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{H}_2\text{C} \quad \text{O} \quad \text{O} \quad \text{H}_2\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array} \right] \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_2\text{O}(\text{OO}) \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{O}_2$$

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-03-00411.